

Szelektív iontranszport számítása póruson keresztül a Nernst-Planck egyenlethez csatolt Lokális Egyensúlyi Monte Carlo szimulációval

*Készítette: Kovács Róbert
Mérnöki Kar, Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék*

Témavezető: Dr. Boda Dezső

A dolgozat célja ionok póruson keresztüli transzportjának tanulmányozása egy molekuláris modell alapján. Az általunk megfigyelt rendszer egy biológiai példa: egy modell-kalciumcsatorna szelektivitását vizsgáljuk. Kiszámítjuk, hogy különböző összetételű NaCl-CaCl₂ elegyből hány darab Na⁺ illetve Ca²⁺ ion halad át a csatornán. Feltesszük, hogy a transzport diffúzió és hogy azt a Nernst-Planck egyenlet (NP) írja le. A feladat megoldásához szükségünk van a koncentráció és az elektrokémiai potenciál között egy összefüggésre, amit jelen esetben a Lokális Egyensúlyi Monte Carlo (LEMC) szolgáltat számunkra (NP+LEMC módszer).

Az NP+LEMC rendszerben iteratív módon kapjuk a megoldást, ahol az iteráció alapját az képezi, hogy a kontinuitási egyenletnek (az anyagmegmaradásnak) teljesülnie kell.

Eredményeink rávilágítanak arra, hogy a kalciumcsatorna szelektivitása (a Ca²⁺ és Na⁺ ionok fluxusaránya) egyszerre függ attól, hogy a különböző ionok milyen valószínűséggel adszorbeálódnak a pórusba, illetve hogy melyik mennyire mozgékony a csatornában. Megvizsgáljuk a kialakított geometriai rendszer paramétereinek változtatásának hatását a kialakuló koncentráció és kémiai potenciál profilokra.

Az irodalomban megtalálható, pórusra vonatkozó Dinamikai Monte Carlo adatokat felhasználva eredményeinket ellenőrizzük és összehasonlítjuk.